

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА ПО ГРАНИЦАМ ЗЕРЕН В ТИТАНЕ

К.Б. Байтурсинов

Научный руководитель: ассистент, к.ф.-м.н. Н.В. Чистякова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [kuat-1994@mail.ru](mailto:kuat-1994@mail.ru)

## SIMULATION OF HYDROGEN DIFFUSION ON TITANIUM GRAIN BOUNDARY

K.B. Baitursinov

Scientific Supervisor: assistant, candidate of physical and mathematical sciences N.V. Chistyakova

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: [kuat-1994@mail.ru](mailto:kuat-1994@mail.ru)

**Abstract.** In the present study, we calculated the diffusion of hydrogen in titanium. For this purpose, the molecular dynamics method was used in the LAMMPS software package. The results of simulation of hydrogen diffusion in an ideal crystal and with a lattice having defects as grain boundaries are presented.

**Введение.** Проникновение и накопление водорода в титановых продуктах в результате значительного изменения их физических, химических и эксплуатационных свойств и разрушения вследствие водородного охрупчивания. Поэтому система титан-водород является предметом интенсивного изучения в настоящее время. В дополнение к экспериментальным методам исследования в физике конденсированных сред широко используются методы компьютерного моделирования.

**Метод моделирования.** Моделирование проводилось методом молекулярной динамики LAMMPS. LAMMPS - программное обеспечение открытого кода для моделирования методом молекулярной динамики, разработанное в национальных лабораториях Sandia, США [1].

Определение потенциала межмолекулярного взаимодействия является определяющим фактором моделирования молекулярной динамики. Только межатомный потенциал определяет силу, действующую на атомы и, следовательно, как двигаются атомы, а также все параметры кристаллической решетки.

В этой работе мы используем потенциал, развитый в [3]. Потенциальным типом является метод погруженного атома с угловая зависимость потенциала (МПА УЗП).

$$U = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_i (\mu_i^\alpha)^2 + \frac{1}{2} \sum_i (\lambda_i^{\alpha\beta})^2 - \frac{1}{6} \sum_i v_i^2$$

Коэффициенты определяются выражениями:

$$\mu_i^\alpha = \sum_{j \neq i} u_{ij}(r_{ij}) r_{ij}^\alpha, \quad \lambda_i^{\alpha\beta} = \sum_{j \neq i} w_{ij}(r_{ij}) r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta, \quad v_i = \sum_\alpha \lambda_i^{\alpha\alpha}$$

Индексы  $\alpha, \beta$  соответствуют трем направлениям системы координат  $x, y$  и  $z$ . Вектор  $\mu_i^\alpha$  и тензор  $\lambda_i^{\alpha\beta}$  соответствуют дипольным и квадрупольным моментам и описываются парой дополнительных функций межатомных расстояний  $u_{ij}(r_{ij})$  и  $w_{ij}(r_{ij})$ . Величина  $v_i$  является импульсом тензора  $\lambda_i^{\alpha\beta}$ .

В этой работе мы построили атомную модель идеального кристаллического титана с решеткой ГПУ и кристаллом титана ГПУ, содержащим границу зерен. Граничный тип зерен представляет собой

симметричную границу наклона  $5\Sigma$ , образующую разориентации двух кристаллитов вдоль оси  $z$  до угла  $36,6$  градуса (рис. 1). и к ним был помещен один атом водорода. Вычислили энергию и сделали расчеты коэффициента диффузии водорода в ГПУ титана. Визуализация структур проводилась с использованием программы OVITO [2].



Рис. 1. Атом водорода в идеальной решетке ГПУ титана (a) и атом водорода на границе  $5\Sigma$  зерен в решетке ГПУ титана (b).

**Результаты и обсуждение.** Во-первых, была определена энергия образования границы зерен  $5\Sigma$ . Для этой цели была найдена минимальная энергия идеальной кристаллической структуры и минимальная энергия кристалла, содержащего границу зерна с тем же числом атомов в системе, а затем была определена их разность по формуле (1) и энергия поглощения атома водорода в идеальной ГПУ-решетке титана. Так же энергия поглощения атома водорода на границе зерен (3) и результаты были представлены в таблице 1.

$$E_{gb}^{form} = E_{gb} - E_{id} \quad (1)$$

$$E_{H_{id}}^{form} = E_{H_{id}} - E_{id} \quad (2)$$

$$E_{H_{gb}}^{form} = E_{H_{gb}} - E_{gb} \quad (3)$$

Таблица 1

Энергии образования титана

$E_{gb}^{form}$ , eV	$E_{H_{id}}^{form}$ , eV	$E_{H_{gb}}^{form}$ , eV
47.88	1.25	-13.63

**Изучение диффузии.** Для определения коэффициента диффузии методом молекулярной динамики вычисляется среднеквадратичное смещение частицы от начальной точки. Среднеквадратичное смещение определяется выражением:

$$\langle \vec{r}^2(t) \rangle = \langle |\vec{r}(t) - \vec{r}(0)|^2 \rangle \quad (4)$$

Там  $\vec{r}(t)$  - положение частиц в момент времени  $t$ ;  $\vec{r}(0)$  - положение частиц в начальной точке.

Усреднение смещения выполняется на всех атомах в системе (или атомах данного типа, если система многокомпонентная).

Из-за уравнения Эйнштейна среднеквадратичное смещение атомов прямо пропорционально времени:

$$\langle \vec{r}^2(t) \rangle = 6Dt \quad (5)$$

Коэффициент пропорциональности  $D$  в этой формуле представляет собой коэффициент диффузии. Таким образом, коэффициент диффузии  $D$  можно определить на основе зависимости среднеквадратичного смещения атомов (MSD) от времени:

$$D = \frac{\langle r^2(t) \rangle}{6t} \quad (6)$$

Выражение (6) показывает, что для определения коэффициента диффузии при данной температуре необходимо построить график зависимости среднего квадратного смещения от времени. Среднеквадратичное смещение увеличивается с ростом температуры. Эта зависимость линейна. Наклон линейной зависимости определяет коэффициент диффузии  $D$ .

На рис. 2 показана зависимость среднеквадратичного смещения образцов при температуре 1000 К. Наклон прямой позволяет определить коэффициент диффузии. Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 2

Параметры диффузии

Идеальная решетка	Решетка с границей зерен
$1.6 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$	$1.8 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$

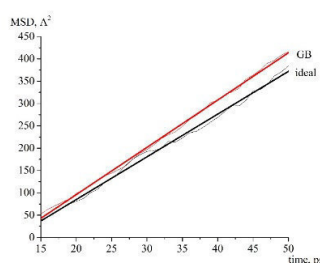
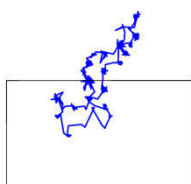
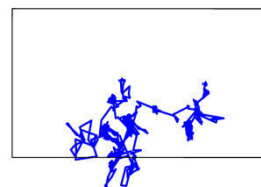


Рис. 2. Зависимость среднеквадратичного смещения атома водорода от времени в идеальной решетке (*ideal*) и в решетке с границей зерен (*GB*)



a)



b)

Рис. 3. Траектории атома водорода в идеальной решетке ГПУ титана (a) и в решетке, содержащей границу зерен (b)

**Вывод.** В результате расчетов было установлено, что адсорбция атома водорода на границе зерен энергетически намного эффективнее, чем в идеальной решетке. Следовательно, атомы водорода должны накапливаться на границе зерен, что подтверждается расчетами молекулярной динамики (рис. 3). Коэффициент диффузии атома водорода в решетке, содержащей границу зерен, немного больше, чем в идеальной решетке. Из этих результатов можно сделать вывод, что атом водорода часто совершает диффузионные скачки, находясь на границе зерен, поэтому коэффициент диффузии в образце, содержащий границу зерен, выше.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov/>
2. Open Visualization Tool. URL: <https://ovito.org/>